计算物理 (B) 上机实验报告

朱沛俊
PB12203216
近代物理系

2015 年 1 月 6 日

1　有限差分法

由于题目的边界十分规则，因此采用有限差分法计算起来十分简单，只需要利用公式：

$$\varphi_{i,j} = (\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i+1,j} + \varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j+1})/4$$

不断进行迭代即可。

本程序 `yxcf.py` 是用 python 语言写的，采用松弛因子 $\omega = 2/(1 + \sin(\pi/n))$ 的超松驰迭代。直接运行它会得到默认的分割对应的的结果。也可以在 python3 中 import 它，然后调用相关函数。具体函数用法可以参见注释或者导入模块后用 `help()` 命令。函数说明：

- `gridcf()` 采用 $n \times n$ 的分割以及默认的边值函数，迭代计算 φ 的值
- `sid()` 函数是边值函数
- `yxcf()` 采用 $n \times n$ 的分割，迭代计算 φ 的值。需要输入边值函数。
- `print3()` 按三位有效数字打印数组

2 有限元素法

用有限元素法解 Laplace 方程第一边值问题，就是利用了能量最低原理，系统的能量

$$E \propto \int (\nabla\varphi)^2 \mathrm{d}S$$

其中 $\propto$ 符号表示正比于。下面采取了与书上不同的一个推导，得出了一个形式紧凑的公式4。

2.1 三角形域的能量公式推导

对于某个三角形 ABC 而言，假设它的三个点电势分别为 $\varphi_a, \varphi_b, \varphi_c$。如图1所示，取 $AB' \perp AC, AC' \perp AB$，则将 $\nabla\varphi$ 的分量合成，有：

$$(\nabla\varphi)^2 = \frac{1}{\sin^2 A}\left(\frac{\varphi_{ab}^2}{c^2} + \frac{\varphi_{ac}^2}{b^2} - \frac{2\varphi_{ab}\varphi_{ac}\cos A}{bc}\right)$$

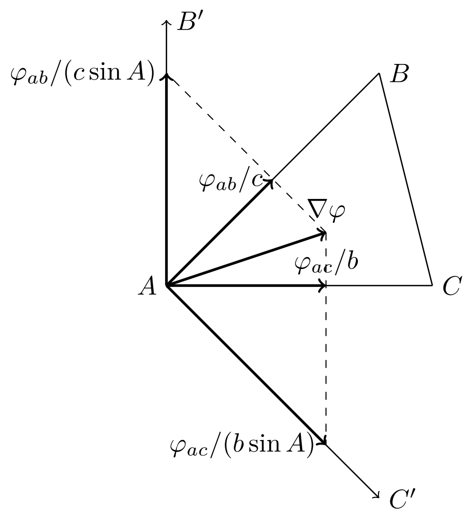

图 1: 用协变与逆变基求解 $(\nabla\varphi)^2$

而它的面积满足：

$$S = \frac{bc\sin A}{2}$$

三角形内的能量满足：

$$E_{\triangle} \propto S(\nabla\varphi)^2 \tag{1}$$
$$\propto \frac{bc}{\sin A}\left(\frac{\varphi_{ab}^2}{c^2} + \frac{\varphi_{ac}^2}{b^2} - \frac{2\varphi_{ab}\varphi_{ac}\cos A}{bc}\right) \tag{2}$$

对 φ_a 求导得到：

$$\frac{\partial E_{\triangle}}{\partial \varphi_a} \propto \left(\frac{b}{c\sin A} - \cot A\right)\varphi_{ab} + \left(\frac{c}{b\sin A} - \cot A\right)\varphi_{ac} \tag{3}$$

其中：

$$\frac{b}{c\sin A} - \cot A = \frac{b - c\cos A}{c\sin A} = \frac{a\cos C}{a\sin C} = \cot C$$

同理

$$\frac{c}{b\sin A} - \cot A = \cot B$$

故3化为

$$\frac{\partial E_{\triangle}}{\partial \varphi_a} \propto \varphi_{ab}\cot C + \varphi_{ac}\cot B \tag{4}$$

2.2 能量取极值时电势的驻点方程

设 E 为总能量，用 i 标记所有包含 A 点的三角形，B_i, C_i 对应于三角形 i 中的另外两个顶点，则：

$$\frac{\partial E}{\partial \varphi_a} = \sum_i \frac{\partial E_i}{\partial \varphi_a} \tag{5}$$
$$= \sum_i \varphi_{ab_i}\cot C_i + \varphi_{ac_i}\cot B_i \tag{6}$$

总能量取极值时，对所有的内点 A 满足 $\partial E/\partial\varphi_a = 0$ 时，:

$$\sum_i \varphi_{ab_i}\cot C_i + \varphi_{ac_i}\cot B_i = 0$$

$$\left(\sum_i \cot C_i + \cot B_i\right)\varphi_a = \sum_i \varphi_{b_i}\cot C_i + \varphi_{c_i}\cot B_i$$

最终得到：

$$\varphi_a = \frac{\sum_i \varphi_{b_i}\cot C_i + \varphi_{c_i}\cot B_i}{\sum_i \cot C_i + \cot B_i}$$

遍历所有的内点，用此方程进行迭代求解就可以求得区域内势函数 $\varphi(x,y)$ 的近似解。

2.3 三角形各角的余切值的计算

假设给定了三个点 A,B,C 的坐标 (x_i,y_i)（计算叉乘时取坐标 $z_i=0$），设 $\boldsymbol{b}=\boldsymbol{AB},\boldsymbol{c}=\boldsymbol{AC}$ 则

$$\cot A = \frac{bc\cos A}{bc\sin A} \tag{7}$$
$$= \frac{\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}}{|\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}|} \tag{8}$$
$$= \frac{\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}}{2S} \tag{9}$$

显然分子分母都是易于计算的形式，且分母对于三个角都是一样的，故只需要计算一次即可。用这个公式也可以类似地计算出系数 $\cot B_i$ 和 $\cot C_i$。

2.4 程序的具体实现

本程序 `yxys.py` 用 python 语言写成，调用了它的 scipy 库里面的稀疏矩阵类。直接运行会得到默认分割方式的结果，它的分割方法是先像有限差分法那样分割，然后再把每个小正方形从左上角到右下角分割为两个三角形。也可以在 python3 中 import 它，然后调用相关函数。具体函数用法可以参见注释或者导入模块后用 `help()` 命令。函数说明：

- `gridtri()` 函数会给出一类分割，可以调节分割的精细程度 n
- `yxys()` 函数可以对任意的分割方式给出有限元素法的迭代解，返回值为所有节点的 φ 值。
- `tris()` 产生了一个特定的三角形分割
- `points()` 和 `sdp()` 分别产生了相应于该分割的内点与边界点的点列
- `tricot()` 函数负责计算三个点对应的 $\cot\theta_i$